

## 6° Workshop CAPI2002

**23 ottobre 2002**

**Supercalcolo nell'ambito delle Nanotecnologie**

**24 ottobre 2002**

**Supercalcolo in Astronomia e Astrofisica**

### Titoli ed abstracts degli interventi

*Keywords:* Supercalcolo, Nanotecnologie, Astronomia, Astrofisica



**23 ottobre 2002**

**Supercalcolo nell'ambito delle Nanotecnologie**

*Prof. Paolo MILANI - Università degli Studi di Milano*

**Proprietà mesoscopiche dei materiali nanostrutturati "La scala mesoscopica vera sfida per il supercalcolo"**

Deposition of clusters from the gas phase has been proposed as an interesting technique for the synthesis of controlled nanostructures on surfaces. Among different experimental approaches, supersonic clusters beam deposition has been shown as a viable route for the production of nanostructured systems ranging from organized nanoislands to nanostructured thin films. To this goals the development of highly intense cluster source is a necessary requisite together with the capability of size selecting the aggregates prior to deposition, while maintaining high particle fluxes.

By using a pulsed microplasma cluster source and by exploiting aerodynamical effects typical of supersonic beams it is possible to obtain very high deposition rates with a control on neutral cluster mass distribution, allowing the deposition of thin films with controlled nanostructure. Due to high deposition rates, high lateral resolution, low temperature processing supersonic cluster beams can also be used for the micro and nanopatterning of cluster-assembled films when little or no post-growth manipulation or assembly is required.

The use of supersonic cluster beams opens also new perspectives for the production of nanostructured films with novel physico-chemical and tribological properties such as nanostructured carbon matrices containing carbide and transition metal particles. Examples based on nanostructured carbon, carbon-metal nanocomposites and nanostructured titania will be discussed.

*Dott. Francesco MONTALENTI - Università degli Studi di Milano-Bicocca*

#### **Simulazione di processi di diffusione e di crescita mediante dinamica molecolare accelerata**

Le scale di tempo sperimentali dei tipici processi di crescita cristallina sono estremamente lunghe (secondi, minuti, perfino ore).

Di conseguenza, risulta impossibile simulare fedelmente tali processi mediante dinamica molecolare (DMC) classica.

Un rimedio utilizzato comunemente nelle simulazioni di crescita con DMC consiste nell'aumentare di numerosi (6-10) ordini di grandezza il flusso di atomi depositati, cercando di bilanciare il minor tempo disponibile per i processi diffusivi con un contemporaneo aumento della temperatura di crescita. Tale trucco non ha nessuna giustificazione teorica, ed è facile dimostrare che le morfologie delle strutture ottenute utilizzando questa tecnica non sono corrette. Alternativamente, le simulazioni possono essere condotte mediante utilizzo del metodo di Monte Carlo Cinetico (MCC). In tali simulazioni, tuttavia, i possibili processi diffusivi devono essere noti a priori, il che causa forti limitazioni nelle capacità predittive dei modelli MCC.

Negli ultimi 5 anni sono stati introdotti alcuni nuovi metodi, come il Parallel Replica Method, il Temperature Accelerated Dynamics Method e il Dimer Method che consentono di simulare lunghe scale di tempo senza avere bisogno di avere informazioni a priori sul comportamento del sistema. Le principali potenzialità\limitazioni di tali metodi verranno discusse, assieme ad alcuni esempi di applicazioni a problematiche di diffusione e crescita.

*Dott. Marco FANCIULLI - INFN - Laboratorio MDM*

#### **Spintronics: experimental and theoretical challenges**

The availability of the next generations of silicon-based devices depends on the solution of challenging problems related to the capability of growing advanced high-k materials, of controlling their interface structure and stability on Si, and of understanding the dopant interaction and charge transport in sub-micron regions. The astonishing advances of microelectronics will continue until device sizes approach atomic dimensions, a realm where a wide variety of novel device concepts will play a relevant role.

The majority of modern microelectronics devices is based on the charge degree of freedom of electrons in semiconductors. Only in some cases information storage is implemented using the spin.

The combination of the two degrees of freedom, charge and spin, can result in enhanced performance of the existing devices and new functionalities. The area of electronics that uses both the charge and the spin is called spintronics. The most successful example of spintronics is the giant magnetoresistance effect in metallic multilayers, which, discovered in 1988, is today a mature technology for read heads in hard disk drives. The semiconductor counterpart, semiconductor spintronics, has not yet advanced to the commercial application stage. I shall discuss some concepts related to advanced spintronics applications on silicon such as ferromagnetic tunnel junctions, ferromagnetically coupled quantum dots, and electron spin resonance based transistors suitable for quantum computing. In particular I shall point out the experimental challenges related to material science issues such as quality of the layers and of the interfaces, and to metrology issues such as the availability of very sensitive characterization tools. I will also overview some of the theoretical techniques utilized to address some critical issues such as spin injections, transport, scattering and decoherence.

*Prof. Marco BERNASCONI - Università degli Studi di Milano-Bicocca*

### **Calcolo da principi primi delle proprietà elettroniche di nuovi materiali a base di carbonio**

We report on the ab-initio calculations of the electronic properties of two new - theoretically proposed - solid phases of carbon obtained from the assembling of fullerenic clusters.

The first system we consider represents the solid phase of the smallest fullerene, C<sub>20</sub>. The crystal has fcc-symmetry and comprises of C<sub>20</sub> cages interlinked by two bridging carbon atoms per unit cell (fcc-C<sub>22</sub>). This phase has mixed sp<sup>2</sup>/sp<sup>3</sup> bonding and might correspond to the new crystalline form recently discovered in carbon films deposited by laser ablation (Z. Iqbal et al., private communication). We have calculated its properties within the framework of density functional theory in the local density approximation, norm-conserving pseudopotentials and plane waves expansions of the Kohn-Sham orbitals. Vibrational properties have been studied within density functional perturbation theory. The calculations requires intensive parallel computing that has been performed on a Ibm Sp<sup>3</sup> parallel machine. We have used the ab-initio codes CPMD [1] and PHONONS and PWSCF (Baroni et al, Sissa, Trieste), parallelized with MPI protocols.

Calculated diffraction pattern and Raman spectrum of our fcc-C<sub>22</sub> solid are in good agreement with experimental measurements on the carbon films and support the claim of discovery of the C<sub>20</sub> fullerite. The crystal is insulating but can be made metallic by doping with interstitial alkali atoms. Calculations on the electronic band structure and electron-phonon interaction suggest that this new fullerite might have interesting superconductive properties when doped with alkali metals. In fact, in the compound NaC<sub>22</sub> the calculated coupling constant  $\lambda N(0)$  is 0.28 eV, a value much larger than in C<sub>60</sub>, as expected from the larger curvature of C<sub>20</sub>. On the basis of the McMillan's formula, the calculated  $\lambda=1.12$  and a  $\mu^*$  assumed in the range 0.3-0.1 a superconducting T<sub>c</sub> in the range 15-55 K is predicted [2].

Secondly, we will report on the properties of a fully sp<sup>3</sup> solid obtained from the coalescence (by sharing hexagonal and pentagonal rings) of the larger C<sub>26</sub> and C<sub>24</sub> fullerenes [3]. The resulting crystal has a clathrate structure with hexagonal symmetry and 40 atoms per unit cell. We predict that this carbon phase is suitable to be n doped by lithium insertion in the fullerenic cages and p doped by substitutional boron. Although not yet synthesized so far, this latter system represents an example of n-type and p-type tetrahedral carbon semiconductor, alternative to the n-doped diamond-like films whose realization is still far from being fully accomplished.

This work has been done in collaboration with G. Benedek, J. Cariboni, S. Gaito, A. Mussi and I. Spagnolatti.

- [1] CPMD V3.5 Copyright IBM Corp 1990-2001, Copyright MPI fuer Festkoerperforschung Stuttgart 1997-2001
- [2] I. Spagnolatti, M. Bernasconi, and G. Benedek, Europhys. Lett. 59 , 572 (2002).
- [3] M. Bernasconi, S. Gaito and G. Benedek, Phys. Rev. B 61, 12689 (2000).

*Prof. Gianfranco PACCHIONI - Università degli Studi di Milano-Bicocca*

### **Nano-catalizzatori supportati**

Cluster-assembled materials open fascinating new routes for tuning physical and chemical properties by changing cluster size. By depositing gas phase size-selected metal clusters from a molecular beam on MgO thin film surfaces in UHV, cluster model nanocatalysts are fabricated which exhibit remarkable chemical activity [1-4]. First principles electronic structure calculations are essential to interpret the experimental results and to provide a microscopic description of the supported nanocatalysts. Density functional theory calculations which model experiments performed in the laboratory of Prof. Ueli Heiz, University of Ulm will be reviewed. The important role of the oxide support and in particular of the point defects in determining the nucleation and growth of the metal particle, and in modifying its electronic properties will be discussed.

- [1] Abbet, S.; Sanchez, A.; Heiz, U.; Schneider, W.-D.; Ferrari, A. M.; Pacchioni, G.; Roesch, N. J. Am. Chem. Soc. 122, 3453 (2000).
- [2] Ferrari, A.M.; Giordano, L.; Roesch, N.; Heiz, U.; Abbet, S.; Sanchez, A.; Pacchioni, G. J. Phys. Chem. 104, 10612 (2000).
- [3] Abbet, S.; Riedo, E.; Brune, H.; Heiz, U.; Ferrari, A.M.; Giordano, L. Pacchioni, G. J. Am. Chem. Soc., 123, 6172 (2001).
- [4] G. Pacchioni, U. Heiz, U. Landman, Nanocatalizzatori ad alta selettività, in "Dossier Nanotecnologie", Le Scienze, Milano 2002.

*Dott.ssa Irene D'Amico – Institute for Scientific Interchange (ISI) di Torino*

**Electronic structure engineering and excitonic entanglement in semiconductor quantum dots**

Since the seminal paper of Esaki and Tsu, semiconductor-based nanometric heterostructures have been the subject of an impressive theoretical and experimental activity, due to their high potential impact in both fundamental and applied research.

One of the main fields of research focuses on exploiting band-gap engineering, namely the splitting of the bulk conduction band into several subbands, to generate/detect electromagnetic radiation in the infrared spectral region. As prototypical devices we shall consider unipolar coherent-light sources like quantum-cascade lasers; they are complex devices, whose core is a multi-quantum-well structure made up of repeated stages of active regions sandwiched between electron-injecting and collecting regions. When a proper bias is applied, an electron cascade along the subsequent quantized-level energy staircase takes place. We shall review and discuss the nature (coherent vs. incoherent) of charge transport in such unipolar quantum devices [1].

An other important area in semiconductor nanophysics/technology is that of quasi zero-dimensional (0D) systems called quantum dots (QDs). The quantized, atomic-like, energy structure of QDs allows for a rich optical spectrum and for a weak interaction of the QD system with environmental degrees of freedom, i.e., for an almost decoherence-free quantum evolution of the carrier subsystem [2]. Moreover, their reduced spatial extension leads to an increase of two-body interactions among carriers and to stronger Coulomb-correlation effects. We shall review and discuss how a proper combination of these two unique features may allow to realize an all-optical quantum information processing in semiconductors [3].

[1] R.C. Iotti and F. Rossi, Phys. Rev. Lett. 87, 146603 (2001).

[2] P. Zanardi and F. Rossi, Phys. Rev. Lett. 81, 4752 (1998).

[3] E. Biolatti, R.C. Iotti, P. Zanardi, and F. Rossi, Phys. Rev. Lett. 85, 5647 (2000).

*Dott. Daniele PASSERONE - CSCS Manno (CH)*

**Lo studio degli eventi rari in fisica, chimica e biofisica con metodi di dinamica molecolare**

Negli ultimi anni è aumentato l'interesse del mondo scientifico nei confronti degli eventi rari, cioè delle transizioni (poco probabili ma importanti) che un sistema compie tra stati stabili separati da un'alta barriera di energia libera. Esempi sono le reazioni chimiche ed alcuni cambiamenti configurazionali in molecole di interesse biofisico.

I normali metodi di simulazione al computer non consentono di accedere alle grandi scale di tempi che entrano in gioco a causa della bassa probabilità dell'evento. Sfruttando però l'informazione sugli stati iniziali e finali, e il fatto che l'evento di passaggio della barriera è spesso intrinsecamente veloce, è possibile sviluppare metodi per estrarre traiettorie che uniscono due punti nello spazio delle configurazioni del sistema. In particolare, in questa presentazione mostrerò un metodo sviluppato nel nostro gruppo che si basa sui principi variazionali della meccanica classica, e sfrutta le proprietà di conservazione dell'energia di un sistema fisico durante il suo moto.

Attraverso successivi raffinamenti, è possibile ottenere, anche per sistemi piuttosto complicati, un cammino di reazione molto simile ad una reale traiettoria dinamica, partendo solo dall'informazione sugli stati iniziale e finale.

A titolo di esempio e di applicazione di questo metodo, saranno mostrati la transizione ad elica di una molecola di trialanina in acqua, il meccanismo di rotazione di due molecole di catenane (con possibili implicazioni industriali, per la fabbricazione di dispositivi di memoria ad altissima densità), e due reazioni chimiche fondamentali come la cicloaddizione di due etileni e la reazione di Diels-Alder. Queste ultime applicazioni sono state realizzate nell'ambito della teoria del funzionale densità, consentendo di trarre interessanti conclusioni sul comportamento degli elettroni durante la reazione.

*Prof. Leonardo COLLETTI - Università degli Studi di Trento e LLNL (USA)*

**Supercomputer e metodi Montecarlo in alcuni casi di studio al Lawrence Livermore National Laboratory**

L'equazione fondamentale che descrive la materia a livello microscopico è nota da almeno settant'anni, ma il suo livello di complessità è tale da renderla di assai ardua soluzione.

All'estremo opposto della scala dimensionale, le proprietà dei materiali possono essere studiate approssimando la materia al continuo. Riuscire a collegare le proprietà macroscopiche di un materiale

alle interazioni quantistiche dei suoi costituenti elementari rappresenta un'impresa scientifica entusiasmante e ricca di possibili ricadute tecnologiche.

Il ricorso ai calcolatori e il succedersi di efficaci metodi di approssimazione ha consentito nella seconda metà del secolo scorso una modellizzazione via via sempre più accurata di varie proprietà della materia, ma pur sempre limitata allo studio di sistemi di poche particelle o a metodi in cui parametri arbitrari e incontrollabili giocavano un ruolo fondamentale. Oggi, grazie agli sviluppi più recenti del metodo Monte Carlo Quantistico e dell'utilizzo di potenti macchine di calcolo parallelo, si è in grado di risolvere in modo esatto alcuni sistemi fisici composti da centinaia di particelle, innestando così la scala nanometrica su quella atomica, permettendo quindi la predizione di caratteristiche della materia altrimenti escluse dagli approcci approssimati.

Grazie ad ASCI White, il secondo calcolatore più potente del mondo, al Lawrence Livermore National Laboratory si aprono le porte alla possibilità di sperimentare nuovi metodi computazionali, come una versione del metodo Monte Carlo priva di arbitrarietà per lo studio di sistemi fermionici, o di affrontare, sempre a partire dai principi primi, insoluti problemi di modellizzazione di materiali sulla scala nanometrica, come il tempo di vita dei positroni negli isolanti, o, ancora, di tentare di seguire un sistema nella sua evoluzione su diverse scale dimensionali e temporali nonché di simulare condizioni estreme in modo da indirizzare successivamente la sperimentazione verso le regioni più interessanti.



**24 ottobre 2002****Supercalcolo in Astronomia e Astrofisica***Prof.ssa Francesca MAZZIA - Università degli Studi di Bari***Soluzione numerica di problemi ai valori al contorno: applicazione al modello differenziale del rendez-vous**

Le equazioni differenziali con valori al contorno sorgono in molte applicazioni. Tra queste, il calcolo della traiettoria ottimale, relativo al consumo di carburante, che permette l'incontro di satelliti nello spazio è particolarmente interessante. Il modello prevede sia l'incontro tra un satellite attivo e uno passivo, sia quello fra più satelliti attivi circolanti su orbite ellittiche.

Lo studio di metodi numerici in grado di costruire la base di codici di calcolo in grado di risolvere efficientemente questo tipo di problemi è stato fatto in maniera approfondita negli ultimi anni. Noi abbiamo sviluppato in ambiente MATLAB il codice TOM per la soluzione di questa classe di problemi. Caratteristiche del codice sono la facilità d'uso e la robustezza. Inoltre il codice produce informazioni sul condizionamento del problema numerico e di quello continuo, dando quindi la possibilità di interpretare al meglio i risultati numerici.

Tale codice verrà utilizzato per calcolare i risultati numerici del modello del rendezvous, facendo vedere che, avendo a disposizione un codice efficiente per la risoluzione di problemi non lineari, non è più necessario utilizzare un modello linearizzato, che nel caso di orbite ellittiche genera traiettorie non corrette.

- [1] F. Mazzia and I. Sgura, Numerical approximation of nonlinear bvps by means of bvms, *Applied numerical Mathematics* 42 (2002), no. 1-3, 337-352
- [2] F. Mazzia and D. Trigiante, Mesh selection strategy for boundary value problems, sottomesso per la pubblicazione.
- [3] J.E.Prussing, Equation for optimal power-limited spacecraft trajectories, *Journal of guidance, control and dynamics*, 16 (1993), no. 2, 391-393.

*Dott. Roberto BEDOGNI - INAF - Osservatorio Astronomico di Bologna***Simulazioni idrodinamiche in campo astrofisico: metodi alle differenze finite**

Le tecniche di integrazione alle differenze finite delle equazioni fondamentali dell'idrodinamica sono ormai alla base dello studio dei fenomeni astrofisici altrimenti non riproducibili in laboratorio. L'uso di supercalcolatori ha permesso di effettuare simulazioni numeriche con un elevato grado di risoluzione in modo da riprodurre strutture analoghe a quelle osservate con i più potenti telescopi.

L'evoluzione dinamica delle Supernovae, l'interazione di onde di urto con il mezzo interstellare, la formazione protostellare e protogalattica sono solo alcuni esempi, tra in tanti, del successo delle tecniche numeriche applicate all'Astrofisica. Molti problemi, sia numerici che fisici, sono ancora aperti ma la strada intrapresa sembra quella buona per gettare nuova luce sui fenomeni astronomici.

*Dott. Ugo BECCIANI - INAF - Osservatorio Astronomico di Catania***FLY: un codice N-body per MPP; tecniche di visualizzazione e distribuzione del calcolo**

Numerical simulations have assumed a great role in the modern scientific investigation, with the evolution of high performance computers allowing us to run simulations with higher and higher resolution.

We present the parallel code FLY (**F**ast **L**evel-based **N**-bod**Y** code), an optimized multi-platform tree N-body code allowing us to evolve three-dimensional self-gravitating collisionless systems with a large number of particles  $N > 10^7$ . The output data produced by such simulations are often multi-dimensional arrays which specify several physical quantities as a function of space position and time. This kind of data poses several problems to be managed and analyzed efficiently.

Consequently, appropriate data analysis and visualization tools must be developed in order to meet their requirements. AstroMD is a tool for data analysis and visualization of astrophysical data which can manage simultaneously different physical quantities and multi-dimensional data sets.

Another important aspect concern the availability of HPC resources and codes for Astrophysical simulations and data analysis. We are creating a portal that permits to handle and use high-performance numerical tools for Astrophysics, on a grid of supercomputers with a user-friendly graphical web interface, that will be soon made to the entire national and international community.

*Dott. Giovanni CARRARO - Università degli Studi di Padova*

**Calcolo ad alte prestazioni e formazione delle galassie: applicazione alle galassie ellittiche**

Nel mio intervento presento il risultato di simulazioni Nbody idrodinamiche della formazione di Galassie Ellittiche. L'intervento si articola nella definizione della problematica Astrofisica, nella descrizione del codice numerico parallelo sviluppato, e nella esemplificazione di un risultato interessante ottenuto con il codice descritto.

Si sottolinea inoltre l'importanza del calcolo ad alte prestazioni per le problematiche riguardanti la formazione delle Galassie in generale.

*Dott. Vincenzo ANTONUCCIO-DELOGU - INAF - Osservatorio Astronomico di Catania*

**Simulazioni cosmologiche: vuoti, ammassi di galassie e gas primordiale**

La Cosmologia contemporanea ha tratto e continua a trarre un'enorme impulso dall'utilizzo di tecniche di calcolo ad alte prestazioni. Negli ultimi 15 anni diversi gruppi di ricerca hanno profuso un costante impegno nello sviluppo di codici di simulazione in grado di sfruttare la veloce evoluzione dell'hardware. Tali codici sono oggi in grado di produrre simulazioni realistiche della distribuzione di materia nella Struttura a Grande Scala dell'Universo, in grado di confrontarsi con l'enorme mole di dati provenienti dalle osservazioni da Terra e dallo spazio. Queste osservazioni rivelano un' Universo molto diverso da quello che i modelli teorici più semplici ed eleganti suggerivano, nel quale esistono vaste zone quasi totalmente prive di materia (i "Vuoti") e la materia stessa è relegata ai confini di questi vuoti, o in tenui filamenti. La complessità topologica di questa distribuzione è invece ben riprodotta nelle simulazioni numeriche ad alta risoluzione compiute anche da gruppi italiani, e lo studio di queste simulazioni apre la strada alla comprensione degli anelli mancanti nella catena degli edifici teorici. Le simulazioni mostrano anche che i vuoti sono permeati da una sottile trama di filamenti di galassie, e le strutture più grandi dell'Universo, gli Ammassi di Galassie, si formano prevalentemente ai "nodi" di questa trama, cioè in quelle regioni dove due o più filamenti si intersecano. Entrambi questi fatti, in forte contraddizione con i semplici modelli teorici elaborati negli anni '70 e '80, sono però in buon accordo con le più recenti osservazioni fatte da satelliti X e dal telescopio spaziale "Hubble". Altre predizioni delle simulazioni, quali la presenza di una notevole quantità di gas "tiepido" nei Vuoti, sono in questi anni oggetto di ricerche spaziali e di osservazioni con i più grandi telescopi terrestri.

Come è evidente da tutto ciò, nello studio dell'origine e dell'evoluzione dell'Universo le simulazioni non giocano più un ruolo ancillare alle osservazioni, ma sono arrivate ad un punto di sofisticazione sufficiente a suggerire nuovi obiettivi alla ricerca. Lo sviluppo dell'hardware e delle relative tecniche di simulazione adattive permetterà di consolidare ed aumentare il ruolo conoscitivo dell'utilizzo di codici numerici per lo studio della Struttura a Grande Scala dell'Universo. Infine, questo sforzo nello studio dei sistemi complessi può avere una significativa ricaduta industriale, se opportunamente sfruttato.

*Dott. Giuseppe MURANTE - INAF - Osservatorio Astronomico di Torino*

**Cosmologia e formazione di galassie**

A partire dalla seconda metà del secolo scorso, un modello teorico in grado di descrivere l'evoluzione dell'Universo a partire dai suoi primissimi istanti è stato sviluppato e raffinato, grazie al confronto con una crescente massa di dati osservativi. Questo modello cosmologico è noto come Big Bang. Grazie soprattutto al calcolo numerico, è stato possibile, a partire dagli anni '70, studiare la formazione delle strutture nell'ambito di tale modello. Dapprima si è studiata soltanto l'azione della forza di gravità, ma grazie allo sviluppo di codici numerici sempre più raffinati ed al continuo aumento della potenza di calcolo disponibile, oggi si è in grado di eseguire simulazioni numeriche della formazione di galassie a partire dalle piccole fluttuazioni di densità previste dal modello. Questo tipo di simulazione deve tener conto di molti processi fisici che vanno al di là della pura gravità, come la dinamica del gas, il suo riscaldamento termodinamico ed il suo raffreddamento per irraggiamento, la formazione di stelle, ed il

contributo energetico fornito al gas dall'esplosione delle supernovae. Alcuni di questi processi non sono ancora noti con precisione, e sono necessarie quindi delle parametrizzazioni all'interno delle simulazioni numeriche.

Nel presente intervento viene descritto a grandi linee il modello cosmologico del Big Bang, e si mostrano alcuni esempi di calcolo numerico di formazione di strutture sia su grande scala (filamenti, muri, ammassi di galassie) che su scala più piccola. Inoltre viene presentato un lavoro numerico del nostro gruppo (G. Murante, A. Curir, P. Mazzei) volto a studiare l'evoluzione della struttura di una singola galassia nel contesto cosmologico, quando si evitano le parametrizzazioni sopra accennate utilizzando un modello precostruito di galassia. Si presentano anche alcuni tests volti a confrontare questo studio con simulazioni complete ed autoconsistenti. Si evidenziano infine i problemi scientifici dell'attuale schema di formazione di strutture ancora esistenti, soprattutto su scala galattica.

*Dott. Gianluigi BODO - INAF - Osservatorio Astronomico di Torino*

#### **Simulazioni tridimensionali di flussi relativistici: metodo e applicazioni astrofisiche**

Fenomeni astrofisici di alta energia coinvolgono la presenza di flussi a velocità relativistiche. Viene qui presentato uno schema numerico, appartenente alla classe dei metodi di Godunov ad alta risoluzione, per la simulazione di flussi relativistici multidimensionali. Questo schema fa uso di ricostruzione parabolica basata sul metodo PPM e di un nuovo solutore di Riemann non lineare basato sull'approssimazione a due shock. Vengono poi discussi i risultati di simulazioni numeriche tridimensionali dello sviluppo di instabilità di Kelvin-Helmholtz in getti relativistici, in relazione alla fenomenologia delle radiosorgenti extragalattiche.

*Prof.ssa Anna M. NOBILI - Università degli Studi di Pisa*

#### **"Galileo Galilei"-GG: un piccolo esperimento spaziale per verificare la Relatività Generale 4 ordini di grandezza più precisamente che a terra**

Il principio di equivalenza, secondo il quale in un campo gravitazionale tutti i corpi cadono con la stessa accelerazione, è il "principio" fondante della teoria della Relatività Generale. Il progetto GG concerne un piccolo satellite in orbita bassa attorno alla terra capace di verificare questo principio 4 ordini di grandezza meglio di quanto ottenuto finora in esperimenti terrestri. L'esperimento si basa su di un accelerometro differenziale in condizioni di rotazione supercritica capace di rivelare, a temperatura ambiente, piccolissimi spostamenti relativi delle masse di prova (inferiori al picometro). Gli scienziati che hanno proposto e studiato la missione GG hanno anche costruito un prototipo dell'accelerometro presso i laboratori della Laben di Firenze. Il progetto GG è fortemente interdisciplinare ed è competitivo con i progetti Microscope e STEP, rispettivamente della agenzia spaziale francese e della NASA.

*Dott. Luca DEL ZANNA - Università degli Studi di Firenze*

#### **Uno schema shock-capturing di tipo centrale per simulazioni astrofisiche di magneto-idrodinamica relativistica**

Le sorgenti astrofisiche di radiazione e particelle ad alta energia vengono generalmente modellizzate supponendo la presenza di onde d'urto relativistiche in plasmi magnetizzati. Nonostante le numerose possibili applicazioni, la ricerca sugli schemi numerici di tipo Godunov per la magneto-idrodinamica relativistica (RMHD) è ancora poco sviluppata.

Nel mio intervento illustrerò le difficoltà intrinseche di questo tipo di codici e presenterò un nuovo schema 'centrale' 3D-RMHD alle differenze finite del terzo ordine spaziale e temporale, mostrando anche alcuni test di rilevanza astrofisica. Il codice è parallelizzato con direttive MPI ed è stato testato su Cray T3E, IBM SP4 e sistemi Beowulf.

*Dott. Luciano REZZOLLA - SISSA*

#### **Simulazioni non lineari di idrodinamica relativistica**

I present results obtained with a three-dimensional general-relativistic hydrodynamics and parallel code, the "Whisky" code, in the study of the long-term dynamics of relativistic stars. The Whisky code, is coupled to the Cactus code for the solution of Einstein equations and is being developed at SISSA and at the Albert Einstein Institute in Golm.

The investigations focus on the pulsations of stable rotating and nonrotating relativistic stars and on the nonlinear evolution of unstable nonrotating relativistic stars. I also discuss the numerical evolution of



both spherical and rapidly rotating, stationary configurations, the formation of an apparent horizon during the collapse of a relativistic star to a black hole and the emission of gravitational waves from a star with quadrupolar oscillations.

Overall, the results obtained represent the most accurate long-term three-dimensional evolutions of relativistic stars available to date.

*Dott. Francesco RUBINI - Università degli Studi di Firenze*

**Dalla convezione nel sole alla simulazione della fase esplosiva di una supernova: il progetto Flash dell'Università di Chicago**

Molti e diversi oggetti astrofisici possono essere descritti con modelli fluidi idrodinamici (HD) o magneto-idrodinamici (MHD). Malgrado la relativa semplicità del modello matematico la simulazione numerica di questi sistemi resta una operazione complessa, a causa dei parametri astrofisici e conseguente estensione delle scale del sistema, o per la complessità del modello termodinamico. Il talk si propone di passare in veloce rassegna alcuni esperimenti mirati alla comprensione di fenomeni diversi, dal trasporto convettivo di energia all'interno delle stelle alla esplosione di supernovae. Punto di contatto di tali esperimenti, nella evidente diversità di regimi e situazioni, è l'uso intensivo del supercalcolo e delle tecniche numeriche più recenti.

